ブラウン運動論と量子力学（Ⅷ）

佐賀大・理工・工化　竹山尚賢

（6月22日受理）

§1　一つの注意

Hill と Wheeler（1953）は，有名な啓蒙的論文[1)]の中で，自由粒子が収容されている高さ∞のポテンシャル壁が動く場合を考察した。この問題は，戸田氏の力作"振動論"（培風館，1968）96頁の例2，及び問1にもとり入れられている。

$0 \leqq x \leqq L$ の間で動く自由粒子のエネルギーは，$E=(m/2)\dot{x}^2$ であり，作用変数は $J=\oint m\dot{x}\,dx=2m\dot{x}L$，これは Ehrenfest の意味で断熱不変であるから量子化されて $J=2\pi n\hbar$，従って $m\dot{x}=\pi n\hbar/L$，$E=(\hbar^2/2m)\times(n\pi/L)^2$。この場合，断熱不変とは，$\dot{x}L(t)=\mathrm{const.}$ の条件が破れない程度に $L(t)$ がゆっくり動いても J は不変ということであるから，$\ddot{x}=-(\dot{L}/L)\dot{x}$ の加速度，あるいは，定数は省いて $\dot{x}=-(\dot{L}/L)\,x$ の速度が存在しうる。この速度を勾配としてもたらす"速度ポテンシャル"は

$$\phi(x,t)=-(\dot{L}/L)(x^2/2) \tag{1}$$

と求まる。$\dot{L}=\mathrm{const.}$ で壁が動いても

$$|dx|/x \gg |dL(t)|/L(t)$$

のもとで依然断熱不変であり，自由粒子のエネルギーは，$E(t)=(\hbar^2/2m)\times\{n\pi/L(t)\}^2$ で与えられ，その時間依存性は $L(t)$ を通して現われるにすぎない。波動力学の場合でも（L がゆるやかに変る場合）壁の動きの影響は，速度ポテンシャルによってとらえて

$$\psi(x,t)=(2/L)^{1/2}\sin(n\pi x/L)\times\exp(-i\textstyle\int E\,dt/\hbar)\exp\{im\phi(x,t)/\hbar\} \tag{2}$$

が解となる。いう迄もなく，Schrödinger 方程式は

$$i\hbar\ \partial\psi/\partial t = -(\hbar^2/2m)\,\partial^2\psi/\partial x^2 \tag{3}$$

である。問題は次であり，壁が加速度$\ddot{L}$を有して動くとき，(3) に (2) 及び (1) を用いて，Schrödinger 方程式は次のようになると Hell & Wheeler はいう。

$$i\hbar\ \partial\psi/\partial t = -(\hbar^2/2m)\,\partial^2\psi/\partial x^2 - (mx^2/2)(\ddot{L}/L)\psi \tag{3'}$$

もしそうだとすれば，壁を周期的に

$$L(t) = L_0\ \exp(i\omega_0 t) \tag{4}$$

動かすと (3′) は正しく調和振動子に対するものとなり，本質的に系が変ってしまうこととなる。いや (3) が (3′) となること自体が本質的変化を意味しているわけで，Wheeler らの意図は，問題の項を P/ρ (圧力／密度) (×質量) の"圧縮エネルギー"とみて"流体力学的描像"につなごうとしたようにみられる。

(3′) の右辺第2項は，(2) を (3) に代入したときの

$$m\,\partial\phi(x,t)/\partial t = -(mx^2/2)(\ddot{L}/L)$$

に由来するが，その他に

$$(m/2)\{\partial\phi(x,t)/\partial x\}^2 = (m/2)v^2 = (\dot{L}/L)^2(mx^2/2)$$

が存在し，(3) からの実数部分は，

$$m\,\partial\phi/\partial t + (m/2)v^2 = 0 \tag{5}$$

を主張することになるから Schrödinger 方程式の第1種ゲージ変換に対する不変性が保たれていることを知ったにすぎない。

(5) は速度ポテンシャルを (1) にとっている限り

$$\ddot{L}/\dot{L} = \dot{L}/L \tag{5'}$$

と同等であり，(4)はその解でもあるが，自由粒子の壁を振動させることにより，それが調和振動子に転化することは起りえないのである。

§2　流体力学的描像 ― 密度のゆらぎ

Schrödinger 方程式

$$i\hbar\,\partial\psi/\partial t = -(\hbar^2/2m)\triangle\psi + U\psi \qquad (6)$$

は，$\psi = \exp(R/\hbar)\exp(iS/\hbar)$，R, S は実関数，とおいて次式となる。

$$\partial S/\partial t = -(\nabla S)^2/2m - U + (\nabla R)^2/2m + (\hbar/2m)\nabla^2 R, \qquad (6.a)$$

$$\partial R/\partial t = -(\nabla S\cdot\nabla R)/m - (\hbar/2m)\nabla^2 S \qquad (6.b)$$

ここで $R = \mathrm{const.} \equiv R_0$ の状態は (6.a & b) の一つの特解であるから，そのまわりに

$$R = R_0 + \delta R \qquad (7.a)$$

のようにゆらいでいる場合を考えよう。ところで $\rho = \psi^*\psi$ に対して，$R = (\hbar/2)\ln\rho$ であるから ρ のゆらぎとしてみると，ゆらぎ部分 $\delta\rho$ の1次近似で

$$\delta R \fallingdotseq (\hbar/2)\,\rho_0^{-1}\cdot\delta\rho \qquad (7.b)$$

が成立する。ρ_0 は座標に依存しない密度。

Sに関しては一般に

$$\nabla S = \vec{P} \qquad (7.c)$$

としておいて，(6.a & b) は，$\delta\rho$ の1次近似で次式となる。

$$\left.\begin{aligned} &\partial S/\partial t = -P^2/2m - U + (\hbar^2/4m\rho_0)\nabla^2\delta\rho, \\ &\partial\delta\rho/\partial t = -(\vec{P}/m)\nabla\delta\rho - (\rho_0/m)\nabla\cdot\vec{P} \end{aligned}\right\} \qquad (8)$$

(8) の後の式は

$$-d\delta\rho/dt = (\rho_0/m)\nabla\cdot\vec{P} \tag{8.a}$$

さらに微分して

$$-d^2\delta\rho/dt^2 = (\rho_0/m)\nabla\cdot\dot{\vec{p}} \tag{8.b}$$

となる。一方 (8) の先の式の勾配をとって

$$\dot{\vec{p}} = -\nabla U + (\hbar^2/4m\rho_0)\nabla^3\delta\rho, \tag{8.c}$$

これを (8.b) に代入して次式がえられる。

$$\delta\ddot{\rho} = (\rho_0/m)\nabla^2 U - (\hbar^2/4m^2)\nabla^4\delta\rho \tag{9}$$

これに Fourier 成分 $\delta\rho(k)$, $U(k)$ を導入し，半古典的に，従って角振動数 ω を用いて調和解を求めると (random phase) 近似のもとで

$$\{\omega-(\vec{k}\cdot\vec{p})/m\}^2\delta\rho(k)$$
$$= (\rho_0/m)k^2U(k) + (\hbar^2k^4/4m^2)\partial\rho(k)$$

から

$$\delta\rho(k) = \frac{(\rho_0/m)k^2U(k)}{\{\omega-(\vec{k}\cdot\vec{p})/m\}^2-(\hbar^2k^4/4m^2)}$$

となり，分散関係

$$\frac{(\rho_0/m)k^2U(k)}{\{\omega-m^{-1}(\vec{k}\cdot\vec{p})\}^2-(\hbar^2k^4/4m^2)} = 1 \tag{10}$$

を満す ω が存在すれば (9) は調和振動をなすことがいえる。

量子過程と力学化された拡散過程との間の正確な対応の成立からも期待されるように，流れ系の取扱いに適した描像であることがわかるが，上述の処方では系の流速 $\vec{p}/m$ は単なるパラメータに留っており，密度のゆらぎ振動との関係が明確でない。そこで (8.a) の Fourier 変換形から，$\vec{p}$ と $\vec{k}$ とが平行，

即ち縦波の場合に，この点を明らかにしておかねばならぬ。まず運動量の成分は（8.a）から

$$\vec{p}(k) = +i(m/\rho_0)\delta\dot{\rho}(k)\vec{k}/k^2 \tag{11}$$

がえられる。次に（6.a）から，（7.b）のもとで微小項として落した $(\nabla R)^2/2m$ まで含めて，エネルギー密度を考えよう。

$$\begin{aligned}\langle E\rangle &= -\int\rho\,\partial S/\partial t\,d\tau \\ &= (1/2m)\int\rho p^2 d\tau + \int\rho U\,d\tau \\ &\quad -(\hbar^2/8m)\rho_0^{-2}\int\rho(\nabla\delta\rho)^2 d\tau \\ &\quad -(\hbar^2/4m)\rho_0^{-1}\int\rho\nabla^2\delta\rho\,d\tau \\ &\fallingdotseq (\rho_0/2m)\int p^2 d\tau + \rho_0 U_0 + (1/2)\int U''(\delta\rho)^2 d\tau \\ &\quad -(\hbar^2/8m)\rho_0^{-1}\int(\nabla\delta\rho)^2 d\tau \\ &\quad -(\hbar^2/4m)\int\nabla^2\delta\rho\,d\tau\end{aligned} \tag{12}$$

これを Fourier 分解し（11）を用いて

$$\begin{aligned}\langle E\rangle &= \rho_0 U_0 + \Sigma_k(\hbar^2 k^2/4m)\delta\rho(k) \\ &\quad + \Sigma_k\left[(m/2k^2\rho_0)\,|\delta\dot{\rho}(k)|^2\right. \\ &\quad \left.+ (1/2)\{U''(k) + (\hbar^2 k^2/4m\rho_0)\}\,|\delta\rho(k)|^2\right]\end{aligned} \tag{13}$$

がえられる。この右辺第2項の和は消えるが，$\vec{k}$ 空間で密度のゆらぎがランダムであること，これはまた，［　　　］の中の調和振動の安定性を保証することでもある。密度のゆらぎは調和振動を行なっており，その固有角振動数は

$$\omega^2(k) = \{(\rho_0/m)k^2 U''(k) + (\hbar^2 k^4/4m^2)\} \tag{14}$$

で与えられる。ρ_0 の状態での流速 $\vec{v} = \vec{p}/m$ の影響は，Galilei 変換によって考慮すればよく，

$$\{\omega(k) - m^{-1}(\vec{k}\cdot\vec{p})\}^2 = \{(\rho_0/m)k^2 U''(k) + (\hbar^2 k^4/4m^2)\} \tag{14'}$$

となり，（ポテンシャルが2体間の longrange の性格であるべきことを考えれば），分散関係（14′）は先に示した（10）と完全に一致している。

上記二つの処方は一見かなり異なっているが，同一性格，少くとも線型近似のもとでは同格な半古典論（但し，量子力学との関係は明確）であることを結論できる。理論の段階としては，密度にゆらぎを導入したことにより，量子力学に新しい質が現われていることを認識すべきであろう。半古典の意味は量子力学（Schrödinger 方程式）から古典力学に一歩後退したことと同義ではなく，Schrödinger 場が本来そういう性格をもっているとみるべきであろう。

§3　いわゆるロトン模型の prototype

“調和振動子”は古典概念であるから（13）の〔　　　〕を再度量子化しなければ，そのエネルギーが（n：振動の量子数）

$$\langle E_{ph}\rangle = \Sigma_k \hbar\omega(k)\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{15}$$

となることはいえない。とくに零点振動の項はそうである。しかしながら(13)の振動子には $\hbar^2$ の項が存在しており，（14）のもとで，

$$(13)\text{の}[\;\;] = \{(m\omega^2(k)/2k^2) + (\rho_0 U''(k)/2) + (\hbar^2 k^2/8m)\}\,|\delta\rho(k)|^2/\rho_0 \tag{16}$$

これの ρ_0 状態の近傍での振舞を考えると，$\overline{k^2}$ を変数とみて，右辺第1項と第3項とから，（15）の n＝0 の低限値 $\hbar\omega(k)/2$ の存在がいえる。Abrikosov－Gorkov－Dzyaloshinskii のテキストにみられる論法に従って，[2] 零点振動状態で振動子系の平均エネルギーを定める。

（16）に（14）を使って

$$\{m\omega^2(k)/k^2\}\,\overline{|\delta\rho(k)|^2}/\rho_0 = \hbar\omega(k)/2$$

あるいは，

$$\left.\begin{aligned}&\hbar\omega(k)=(\hbar^2k^2/2m)\,\mathcal{S}^{-1}(k),\\&\text{with}\ \ \mathcal{S}(k)=\overline{|\delta\rho(k)|^2}/\rho_0\end{aligned}\right\}\tag{17}$$

となる。振動子のエネルギーが，どのようになろうとも運動量 $\hbar\vec{k}$ の自由粒子のエネルギーを尺度にして測っていこうとする立場を復活させる。この場合，"Form factor" $\mathcal{S}(k)$ は，$\omega(k)$ が (14) で与えられるから，

$$\mathcal{S}(k)=\frac{\hbar|k|\{(\rho_0/m)U''(k)+(\hbar k/2m)^2\}^{1/2}}{2\rho_0U''(k)+(\hbar^2k^2/2m)}\tag{18}$$

ととっているわけで，

$$\begin{cases}|k|\ \text{が小さい領域}\quad \mathcal{S}(k)\sim(\hbar/2)\{m\rho_0U''(0)\}^{-1/2}|k|,\\|k|\ \text{が大きい領域}\quad \mathcal{S}(k)\ \sim\ 1\end{cases}$$

の基本的性格は備えている。

密度のゆらぎによる振動は未励起の状態を考える。(16) から (17) への移行でなしたことが必ずしも自明ではないからである。その為に (13) における密度の振動の部分のエネルギーを書き出す。

$$\begin{aligned}&\Sigma_k\big[(1/2m)(m|\delta\dot{\rho}(k)|/\sqrt{\rho_0}|\vec{k}|)^2\\&\quad+(1/2)m\omega^2(k)(|\delta\rho(k)|/\sqrt{\rho_0}|\vec{k}|)^2\big]\\&=\Sigma_k\big[(1/2m)p^2(k)+\{m\omega^2(k)/2\}q^2(k)\big]\\&=\Sigma_k H_{osc}(k)\end{aligned}\tag{19}$$

ただし，$\omega^2(k)$ は (14) で与えられ，

$$\left.\begin{aligned}&\vec{p}(k)=+i\,(m/\sqrt{\rho_0})(\vec{k}/k^2)\,\delta\dot{\rho}(k),\\&\vec{q}(k)=+i\,(1/\sqrt{\rho_0})(\vec{k}/k^2)\,\partial\dot{\rho}(k)\end{aligned}\right\}\tag{19.a}$$

である。ここで新たに交換関係

である。ここで新たに交換関係

$$[\vec{p}(k),\ \vec{q}(k)] = -i\hbar \tag{19.b}$$

を設けて（19）を演算子化し，再度 Schrödinger 方程式をたてて固有値（15）がえられるが，その基底状態の波動関数及び固有値が，

$$\left.\begin{aligned} &\Phi_0(\vec{q}) = N_0 \exp\{-\sum_k (m\omega/2\hbar)|\vec{q}(k)|^2\}, \\ &\langle E_{ph}^{(0)} \rangle = \sum_k \hbar\omega(k)/2 \end{aligned}\right\} \tag{19.c}$$

と求まる。同じ状態を $\vec{p}(k)$ 表示で示すと

$$\Psi_0(\vec{p}) = N_0' \exp\{-\sum_k |\vec{p}(k)|^2/2m\omega\hbar\} \tag{19.d}$$

となる。どちらでも同じであるが，$\vec{q}$ 表示の場合 $|\vec{q}(k)|^2$ の $\Phi_0(\vec{q})$ による量子力学的期待値として，

$$\overline{|\vec{q}(k)|^2} = (\hbar/2)\{m\omega(k)\}^{-1}, \tag{20.a}$$

あるいは（19.a）により

$$k^{-2}\overline{|\delta\rho(k)|^2/\rho_0} = (\hbar^2/2m)\{\hbar\omega(k)\}^{-1} \tag{20.b}$$

がえられ，これは（17）に他ならない。この状態は，$|\delta\rho(k)|$ に関して，Gaussian であり，密度のゆらぎの意義が明らかであろう。このようにして密度のゆらぎをめぐって，再びブラウン運動論的描像が復活することを注意しておきたい。例えば（8.c）にさか上ると，力のバランスにおける右辺第2項は正しく密度の“拡散”に対する揺動力であり，初めの取扱いの中では調和解に生きてくるが，後の取扱いの中では $\vec{k}$ 空間で一次項である為に消えることとなり，両者が同じ結果をもたらすことは，ゆらぎの2乗平均によりエネルギーが規定されるからである。

§4　多体問題との関連

ところで我々は単体問題から出発し，表式としては最も素朴なレベルでみて

きたわけであるが，驚くべき単純な処方で Landau（1941）にその源を発する“量子流体力学”乃至 Bogoliubov（1947），Bohm & Pines（1951），Bloch（1934），Tomonaga（1950）らにより創られた“集団運動の理論”への関連がえられたことが認められよう。この分野は，この20年間に非摂動論的方法の系統的発展と合流し，多体系に関する量子力学の様相を変えてしまい，現在の『物性研究』に到っている。線型近似が非線型理論に進められつつあるにしても，一つの基本路線がしかれてしまったかにみえる。

ここでみたように単体系の量子力学の中に phonon－roton 理論の prototype があり，その reality は別にして一般基礎式（6.a & b）の線型化であり，それは，$R=(\hbar/2)\ln\rho=\mathrm{const.}$ が一つの exact solution であることにより，このまわりで数密度のゆらぎを導入してえられた。このPrototype が存在しなければ多体系といえども phonon－roton 理論は成立しえなかったであろう。この意味で観念論＝reality の欠如とする批判にたえておきたい。その理由は多体問題といえども何等かの近似による単体問題化である点に求められよう。そこで先ず同種N体系を Hartree 近似で考えてみる。単体 j の挙動は

$$i\hbar\,\partial\psi_j(\vec{q},t)/\partial t=\{-(\hbar^2/2m)\nabla^2+ \\ +\sum_i\int d^3q'\,U(|\vec{q}-\vec{q}'|)|\psi_i(\vec{q}',t)|^2\}\psi_j(\vec{q},t) \tag{21}$$

によって支配される。ここでも

$$\psi_j(\vec{q},t)=\exp(R_j/\hbar)\exp(iS_j/\hbar), \tag{21.a}$$

$$\rho_j=|\psi_j|^2=\exp(2R_j/\hbar)$$

とおいて次の連立式がえられる。

$$\left.\begin{aligned}\partial S_j/\partial t=&-(1/2m)(\nabla S_j)^2-\sum_i\int d^3q'\,U(r)\,\rho_i(\vec{q}',t)\\&+(1/2m)(\nabla R_j)^2+(\hbar/2m)\nabla^2R_j,\\ \partial R_j/\partial t=&-(\nabla S_j\cdot\nabla R_j)/m+(\hbar/2m)\nabla^2S_j\end{aligned}\right\} \tag{21.b}$$

この場合も，$R_j = R_j^0 = \mathrm{const.}$ は一つの厳密解であり，そのとき

$$S_j^0 = (\vec{p}_j^{\,0} \cdot \vec{q}) - E_j^0 t + \mathrm{const.}$$

となる。R^0 のまわりにゆらぎを導入し，(21.b) を線型化し，前と全く同様にして分散関係

$$\sum_j \{ \omega - (\vec{k} \cdot \vec{p}_j^{\,0}) \}^2 = (\rho_0/m) k^2 U(k) + (\hbar k^2/2m)^2 \quad (21.c)$$

がえられる。次に (21.b) の第一の式に ρ_j をかけた式をとり，それの相互作用項において，$\rho = \rho_0 + \delta\rho$ のようにゆらぐとき，$\delta\rho$ について２次の項は次のようになる。

$$(1/2) \sum_{i,j}{}' \int d^3 q\, \delta\rho_j (\vec{q}, t) \int d^3 q'\, U(|\vec{q} - \vec{q}\,'|)\, \delta\rho_i (\vec{q}\,', t)$$

§２において $U(k) = U''(k)$ となるのはハミルトニアン密度において相互作用が密度の２次形式である場合に限られ，そこにおける単体問題は Hartree の意味での多体問題であったことを知る。相関の問題としてみれば，位置空間だけでことたりるのは，long range な相互作用で粒子系が相関している場合であり，交換の効果のように short range な相互作用が働く（一般には共存）場合には，その影響をどのようにとりこんでいけばよいのかという問題が残る。この問題にブラウン運動論的観点から攻めるには，位置空間の下にならされている運動量空間とも関係する“激しいゆらぎ”をどのようにして考慮に入れ，位置空間における long range なゆらぎと共存もしくは干渉させるかという問題になると思う。Hartree 近似を Fock のレベルに迄上げることとどう関連するのか，そして究極的には流体力学的な連続媒体の中に有限の寿命をもった粒子像が浮び出るものかどうかの問題であろう。これは密度の long range なゆらぎ（＝調和振動）の偽量子としての phonon ではなく，short range で運動量に依存して“衝突”しあい賦活されたり，失活したりしている系の構成要素の粒子像である。

Schrödinger 方程式が殆んど連続に流体力学的描像に結びついている以上，“非線型の問題”とは別に，重大な問題が期待できるかもしれない。

文　献

1） D.L.Hill and J.A.Wheeler, Phys. Rev., 89. 1102 (1953).

2） アブリコソフ，ゴリコフ，ジャロシンスキー著；松原，佐々木，米沢訳「統計物理学における場の量子論の方法」（東京図書，1970）8～9頁